

1. Über Zustände und Operatoren in der Quantenmechanik (12 Punkte)

- a) (3 Punkte) Es sei  $\{|a\rangle\}$  eine Basis orthonormierter Eigenzustände des Operators  $\hat{A}$ , mit  $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ . Drücken Sie einen Zustand  $|\psi\rangle$  in dieser Basis aus. Arbeiten Sie mit der Dirac-Notation. Finden Sie einen Ausdruck für den Erwartungswert  $\langle \hat{A} \rangle_\psi \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  und interpretieren Sie das Ergebnis.
- b) (2 Punkte) Geben Sie die Heisenbergsche Unschärferelation für den Ortsoperator  $\hat{x}$  und Impulsoperator  $\hat{p}$  an und diskutieren Sie deren physikalische Implikation.
- c) (3 Punkte) Berechnen Sie den Kommutator  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}$  für die Leiteroperatoren  $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}/x_0 + ix_0\hat{p}/\hbar)$  und  $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}/x_0 - ix_0\hat{p}/\hbar)$ , und einer Länge  $x_0$ .
- d) (4 Punkte) Diskutieren Sie die zwei Bilder (Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild) der Quantenmechanik. Geben Sie jeweils Kerneigenschaften von Zuständen und Operatoren wieder.

*Hinweis:* Beantworten Sie welche Zeitabhängigkeit für Operatoren/Zustände in jedem Bild gelten. Geben Sie die jeweilige Bestimmungsgleichung an.

**Lösungsskizze:**

- a) Eine Basis  $\{|a\rangle\}$  orthonormierter Zustände  $\langle a|a'\rangle = \delta_{a,a'}$  erlaubt es einen Ausdruck für die Identität zu finden, nämlich  $\mathbb{I} = \sum_a |a\rangle\langle a|$ . Es gilt dann

$$|\psi\rangle = \mathbb{I}|\psi\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\psi\rangle = \sum_a \lambda_{\psi,a}|a\rangle. \quad \text{1 Punkt} \quad (1)$$

Wie erwartet, kann man jeden beliebigen Zustand als lineare Superposition aus Basiszuständen schreiben wobei die Koeffizienten gegeben sind durch  $\lambda_{\psi,a} = \langle a|\psi\rangle$ . Für einen normierten Zustand  $\langle \psi|\psi\rangle = 1$  gilt zudem

$$1 = \sum_{a,a'} \lambda_{\psi,a}^* \lambda_{\psi,a'} \langle a|a'\rangle = \sum_a |\lambda_{\psi,a}|^2 \quad (2)$$

Der Erwartungswert  $\langle \hat{A} \rangle_\psi$  lässt sich nun schreiben als

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_{a,a'} \lambda_{\psi,a}^* \lambda_{\psi,a'} \langle a|\hat{A}|a'\rangle = \sum_a |\lambda_{\psi,a}|^2 a \quad \text{1 Punkt} \quad (3)$$

Damit beschreibt  $|\lambda_{\psi,a}|^2$  die Wahrscheinlichkeit bei einer projektiven Messung von  $\hat{A}$  auf  $|\psi\rangle$  das Ergebnis  $a$  zu erhalten. [1 Punkt, benötigt Gl. (2)]

- b) Wendet man die Schwarzsche Ungleichung auf den Hilbertraum von Zuständen an, ergibt sich für beliebige Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  und für beliebige Zustände  $|\psi\rangle$  eine Ungleichung der Form  $\langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|^2 / 4$ , wobei  $\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  ist, und  $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  den Kommutator bezeichnet.

Für  $\hat{A} = \hat{p}_\alpha = -i\hbar\partial_\alpha$  und  $\hat{B} = \hat{x}_\beta$  lautet der Kommutator  $[\hat{p}_\alpha, \hat{x}_\beta] = -i\hbar\delta_{\alpha,\beta}$ .  
Damit besagt die Heisenbergsche Unschärferelation (für beliebiges  $|\psi\rangle$ )

$$\langle(\Delta\hat{p}_\alpha)^2\rangle\langle(\Delta\hat{x}_\beta)^2\rangle \geq (\hbar^2/4)\delta_{\alpha,\beta} \quad \text{1 Punkt} \quad (4)$$

dass für jede räumliche Richtung der Aufenthaltsort und der Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig genau bestimmt werden kann **1 Punkt**. Im Gegenteil, je genauer der Ort ermittelt wird, desto grösser ist die Ungenauigkeit des Teilchenimpulses.

c) Es gelten die Kommutatorrelationen

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \quad \text{1 Punkt} \quad (5)$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \quad \text{1 Punkt} \quad (6)$$

zwischen Orts- und Impulsoperator und damit gilt (Kommutator ist bilinear)

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}/x_0 + ix_0\hat{p}/\hbar), \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}/x_0 - ix_0\hat{p}/\hbar) \right] \quad (7)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ (1/x_0^2)[\hat{x}, \hat{x}] - (i/\hbar)[\hat{x}, \hat{p}] + (i/\hbar)[\hat{p}, \hat{x}] + (x_0/\hbar)^2[\hat{p}, \hat{p}] \right\} \quad (8)$$

$$= 1 \quad \text{1 Punkt} \quad (9)$$

d) Schrödinger Operatoren sind in diesem Bild (meistens) zeitunabhängig. Insbesondere gilt dies für alle Hamilton-Operatoren  $\hat{H}$  mit zeitunabhängigen Potentialen die bisher behandelt wurden (harmonischer Oszillator, Coulomb Potential, Potentialtopf, Delta-Kämme, ...)

Zustände sind – im Gegenzug – zeitabhängig **1 Punkt** für beide Aussagen] und genügen der Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\Psi(x, t) = \hat{H}\Psi(x, t). \quad \text{1 Punkt} \quad (10)$$

Die Dynamik der Zustände ist dann gegeben durch

$$\Psi(x, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\Psi(x, 0) \quad (11)$$

Heisenberg Die Gleichung (11) kann zusammen mit nun genutzt werden um den Erwartungswert einer Observable  $\hat{O}$  zu schreiben als

$$\langle\Psi(x, t)|\hat{O}|\Psi(x, t)\rangle = \langle\Psi(x, 0)|\hat{O}(t)|\Psi(x, 0)\rangle \quad (12)$$

wobei nun die gesamte Zeitabhängigkeit in  $\hat{O}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  steckt: Zustände sind in diesem Bild zeitunabhängig. Operatoren sind zeitabhängig **1 Punkt** für beide Aussagen] und genügen der Heisenbergschen Bewegungsgleichung

$$i\hbar d\hat{O}(t)/dt = [\hat{O}(t), \hat{H}] + i\hbar\partial_t\hat{O}(t). \quad \text{1 Punkt} \quad (13)$$

## 2. Teilchen in einer Dimension

(14 Punkte)

In einem eindimensionalen Problem sei  $\{\psi_n(x), n \in \mathbb{N}_0\}$  ein Orthonormalsystem von Eigenzuständen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit den Eigenwerten  $E_n = (2n+1)E_0$ . Die genaue Kenntnis des zugehörigen Potentials  $V(x)$  ist zur Beantwortung der Aufgaben nicht notwendig; es gilt allerdings  $V(-x) = V(x)$ .

- a) (4 Punkte) Geben Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung wieder und bestimmen Sie den zeitlichen Verlauf der Zustände  $\Psi_n(x, t)$  ausgedrückt durch die Wellenfunktion zum Zeitpunkt  $t = 0$ ,  $\Psi_n(x, 0) = \psi_n(x)$ .
- b) (4 Punkte) Ein Teilchen wird im Zustand  $\Psi(x, 0) = \psi_4(x)$  präpariert. Zu einer späteren Zeit  $t$  wird die Position des Teilchens im Zustand  $\Psi(x, t)$  gemessen. Finden Sie einen Ausdruck für dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\rho(x, t)$  und berechnen Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit sich das Teilchen im Bereich  $x \geq 0$  befindet.

*Hinweis:* Der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  des Problems ist nicht entartet und vertauscht mit dem Paritätsoperator  $\hat{P}$ , d.h.  $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ . Es gilt  $\hat{P}\Psi(x, t) = \Psi(-x, t)$ .

- c) (6 Punkte) Geben Sie die zeitliche Entwicklung des Zustandes  $\Psi(x, t)$  mit dem Anfangswert  $\Psi(x, 0) = \nu[\psi_0(x) + \psi_1(x)]$  an, und diskutieren Sie die geeignete Normierung  $\nu$ . Zeigen Sie, dass es ein periodisches Verhalten gibt,  $\Psi(x, t+T) = \Psi(x, t)$ , bestimmen Sie die kleinste Periode  $T$  und berechnen Sie den Zustand  $\Psi(x, T/2)$ .

### Lösungsskizze:

- a) Die zeitabhängige Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar\partial_t\Psi(x, t) = \hat{H}\Psi(x, t) \quad \text{1 Punkt} \quad (14)$$

wobei  $\hat{H}$  der Hamilton-Operator des Problems ist. Für einen Eigenzustand führt der Separationsansatz

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x)\chi_n(t), \quad \text{1 Punkt} \quad (15)$$

zur Differentialgleichung

$$i\hbar\partial_t\chi_n(t) = E_n\chi_n(t). \quad \text{1 Punkt} \quad (16)$$

Diese besitzt dann die Lösung (auch die Anfangsbedingung ist damit erfüllt)

$$\chi_n(t) = e^{-iE_nt/\hbar} \quad (17)$$

Somit gilt

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}. \quad \text{1 Punkt} \quad (18)$$

- b) Die Wellenfunktion ist so normiert, dass  $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$  die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens wiedergibt **1 Punkt**, d.h.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 \quad (19)$$

Aus der ersten Teilaufgabe geht hervor, dass  $\Psi(x, t) = \psi_4(x)e^{-iE_4t/\hbar}$  und somit ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit (in diesem Fall) nicht zeitabhängig, also

$$\rho(x, t) = \rho(x). \quad \text{1 Punkt} \quad (20)$$

Wegen der Parität und der Abwesenheit von Entartung im Energiespektrum gilt

$$\hat{P}\psi_4(x) = \pm\psi_4(-x) \quad \text{1 Punkt} \quad (21)$$

wobei das Vorzeichen a priori unbekannt ist. Daraus folgt, dass die Wahrscheinlichkeit das Teilchen in jeder Raumhälfte zu finden gleich ist, also

$$\int_0^\infty dx \rho(x) = \int_{-\infty}^0 dx \rho(x) = 1/2. \quad \text{1 Punkt} \quad (22)$$

c) Da der Zustand bei  $t = 0$  aus einer Summe aus Eigenzuständen besteht, ist die zeitliche Entwicklung gegeben durch diejenige jeder einzelnen Komponente, d.h.

$$\Psi(x, t) = \nu[\Psi_0(x, t) + \Psi_1(x, t)] = \nu[\psi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}] \quad \text{1 Punkt} \quad (23)$$

Die Eigenzustände sind normiert und orthogonal, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x)\psi_m(x) = \delta_{m,n}. \quad (24)$$

Daraus ergibt sich für den Zustand  $\Psi(x, t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \quad (25)$$

$$= |\nu|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 + \psi_0^*(x)\psi_1(x)e^{-i(E_1-E_0)t/\hbar} + \psi_1^*(x)\psi_0(x)e^{-i(E_0-E_1)t/\hbar} + |\psi_1(x)|^2$$

$$= 2|\nu|^2. \quad \text{1 Punkt} \quad (26)$$

Die korrekte Normierung von  $\Psi$  verlangt, dass

$$|\nu| = 1/\sqrt{2} \quad \text{1 Punkt} \quad (27)$$

Wegen  $E_n = (2n+1)E_0$  sind die charakteristischen (Kreis-)frequenzen  $\Omega_0 = E_0/\hbar$  und  $\Omega_1 = 3E_0/\hbar$  kommensurabel und es gibt ein periodisches Verhalten. Die zugehörige kleinste Periode ist

$$T = 2\pi\hbar/E_0. \quad \text{1 Punkt} \quad (28)$$

Man verifiziert leicht, dass

$$\Psi(x, t + T) = \nu[\psi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar}e^{-i2\pi} + \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}e^{-i6\pi}] = \Psi(x, t). \quad \text{1 Punkt} \quad (29)$$

Ausserdem gilt

$$\Psi(x, T/2) = \nu[\psi_0(x)e^{-i\pi} + \psi_1(x)e^{-i3\pi}] = -\Psi(x, 0). \quad \text{1 Punkt} \quad (30)$$

### 3. Anisotroper Oszillator in zwei Dimensionen

(16 Punkte)

- a) (7 Punkte) Ein Teilchen befinde sich im zweidimensionalen Potential  $V_0(x, y) = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$ . Geben Sie den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  für dieses Problem an. Zeigen Sie, dass ein räumlicher Separationsansatz sinnvoll ist und führen Sie geeignete Auf- und Absteigeoperatoren für jedes Teilproblem ein. Drücken Sie  $\hat{H}$  und die Eigenzustände  $|n_x, n_y\rangle$  in diesen neuen Operatoren aus (keine Herleitung). Bestimmen Sie das Energiespektrum  $E_{n_x, n_y}$  sowie den Entartungsgrad jedes Energieniveaus.
- b) (5 Punkte) Diskutieren Sie wie das Energiespektrum für ein anisotropes Potential

$$V_\lambda(x, y) = \frac{m\omega^2}{2} \left[ (1 + \lambda)x^2 + (1 - \lambda)y^2 \right] \quad (31)$$

aussieht, wobei  $0 < \lambda < 1$ . Geben Sie insbesondere die Energie des Grundzustandes  $|0, 0\rangle$  sowie der beiden angeregten Zustände  $|1, 0\rangle$  und  $|0, 1\rangle$  an.

- c) (4 Punkte) Wäre das Problem für  $V_\lambda(x, y)$  nicht exakt lösbar, würde ein störungstheoretischer Ansatz basierend auf  $V_0(x, y)$  weiterhelfen. Formulieren Sie damit die Korrektur zur Energie des Grundzustandes zu linearer Ordnung in  $\lambda$ . Schließen Sie mit Symmetrieargumenten auf das quantitative Ergebnis. Beschreiben Sie das Vorgehen um den Unterraum  $\{|1, 0\rangle, |0, 1\rangle\}$  – der bei  $\lambda = 0$  entartet wäre – störungstheoretisch zu behandeln (keine explizite Rechnung).

#### Lösungsskizze:

- a) Das Problem kann in jede Raumrichtung individuell gelöst werden **1 Punkt**. Dies geschieht mithilfe der Auf- und Absteigeoperatoren  $[\eta \in \{x, y\}]$

$$\hat{a}_\eta = (\sqrt{2}/2)(\hat{\eta}/\eta_0 + i\hat{p}_\eta/p_0) \quad \hat{a}_\eta^\dagger = (\sqrt{2}/2)(\hat{\eta}/\eta_0 - i\hat{p}_\eta/p_0) \quad \text{1 Punkt} \quad (32)$$

wobei  $\eta_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ,  $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ . Abgesehen von  $[\hat{a}_\eta, \hat{a}_\eta^\dagger] = -[\hat{a}_\eta^\dagger, \hat{a}_\eta] = 1$  verschwinden alle anderen Kommutatoren dieser Operatoren **1 Punkt**. Der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_\eta \left[ (\hat{p}_\eta^2/2m) + (m\omega^2\hat{\eta}^2/2) \right] \quad (33)$$

vereinfacht sich zu

$$\hat{H} = \hbar\omega \sum_\eta (\hat{a}_\eta^\dagger \hat{a}_\eta + 1/2) \quad \text{1 Punkt} \quad (34)$$

und besitzt die Energieeigenzustände

$$|n_x, n_y\rangle \equiv \frac{(\hat{a}_x^\dagger)^{n_x}}{\sqrt{n_x!}} \frac{(\hat{a}_y^\dagger)^{n_y}}{\sqrt{n_y!}} |0\rangle \quad \text{1 Punkt} \quad (35)$$

wobei der Grundzustand  $|0, 0\rangle = |0\rangle$  aus den Gleichungen  $a_x|0\rangle = a_y|0\rangle = 0$  hervorgeht **1 Bonuspunkt**. Es ist  $|0\rangle = (4\pi\eta_0^2)^{-1/2} e^{-r^2/2\eta_0^2}$ . Die Eigenenergien sind

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1). \quad \text{1 Punkt} \quad (36)$$

Aufbauend auf der Grundzustandsenergie  $E_{0,0}$  gibt es Energiezustände bei ganzzahligen Vielfachen von  $\hbar\omega$ , d.h.  $E_N = \hbar\omega(N + 1)$ . Dabei muss die Summe der Besetzungszahlen  $n_x + n_y = N$  gelten. Es gibt  $N + 1$  Möglichkeiten  $(n_x, n_y)$  so zu wählen, dass  $n_x + n_y = N$ . Also ergibt sich der Entartungsgrad

$$\gamma_N = N + 1. \quad \text{1 Punkt} \quad (37)$$

b) Da sich das Problem in jeder Raumrichtung individuell lösen lässt gilt sofort, dass

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega_+(n_x + 1/2) + \hbar\omega_-(n_x + 1/2). \quad \text{1 Punkt} \quad (38)$$

wobei  $\omega_{\pm} = \omega\sqrt{1 \pm \lambda}$  **1 Punkt**. Der Grundzustand und die beiden ersten angeregten Zustände liegen dann bei

$$E_{0,0} = \hbar(\omega_+ + \omega_-)/2 \approx \hbar\omega(1 - \lambda^2/8) \quad \text{1 Punkt} \quad (39)$$

$$E_{1,0} = \hbar(3\omega_+ + \omega_-)/2 \approx \hbar\omega(2 + \lambda/2 - \lambda^2/4) \quad \text{1 Punkt} \quad (40)$$

$$E_{0,1} = \hbar(\omega_+ + 3\omega_-)/2 \approx \hbar\omega(2 - \lambda/2 - \lambda^2/4) \quad \text{1 Punkt} \quad (41)$$

wobei die Näherungen nur für den Vergleich mit Teilaufgabe c) relevant ist.

c) Der Grundzustand ist nicht entartet. Damit besagt Störungstheorie, dass die Korrektur der Grundzustandsenergie zur linearen Ordnung in  $\lambda$  gegeben ist durch

$$\Delta E_{0,0} = \frac{m\omega^2\lambda}{2} \langle 0, 0 | x^2 - y^2 | 0, 0 \rangle. \quad \text{1 Punkt} \quad (42)$$

Wegen der Rotationssymmetrie des (ungestörten) Problems muss diese Korrektur verschwinden **1 Punkt**. Das geht auch aus der exakten Lösung hervor die keinen linearen Beitrag in  $\lambda$  besitzt.

Für den niedrigsten entarteten Unterraum  $\{|1, 0\rangle, |0, 1\rangle\}$  muss eine entartete Störungsrechnung durchgeführt werden. Dabei muss die Matrix

$$M = \frac{m\omega^2\lambda}{2} \begin{pmatrix} \langle 1, 0 | x^2 - y^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 0 | x^2 - y^2 | 0, 1 \rangle \\ \langle 0, 1 | x^2 - y^2 | 1, 0 \rangle & \langle 0, 1 | x^2 - y^2 | 0, 1 \rangle \end{pmatrix} \quad \text{1 Punkt} \quad (43)$$

berechnet und diagonalisiert werden: die Eigenwerte liefern die Korrekturen zur Energie  $E_1 = 2\hbar\omega$  **1 Punkt**. Die Eigenvektoren geben dann (näherungsweise) die Eigenschwingrichtungen des Oszillators an **1 Bonuspunkt**. De facto bleiben diese unverändert bei  $x$  und  $y$ .

#### 4. Störstelle im Potentialtopf

(21 Punkte)

- a) (4 Punkte) Führen Sie die stationäre Schrödingergleichung für ein freies Teilchen [ $V(x) = 0$ ] in einer Dimension ein und geben Sie die (beiden) unabhängigen Lösungen für positive Energien  $E > 0$  an. Leiten Sie die Energie-Impuls Beziehung her.

Betrachten Sie nun einen unendlichen Potentialtopf mit einer Störstelle:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 a \delta(x), & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| > L/2 \end{cases} \quad (44)$$

Hierbei sei  $\delta(x)$  die Delta-Distribution,  $a$  eine Länge und  $V_0 > 0$  eine Energie. Für  $V_0 > 0$  sind Wellenfunktionen  $\Psi(x)$  bei  $x = 0$  stetig, aber deren Ableitung springt um  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)] = \lambda \Psi(0)$ , mit  $\lambda = (2mV_0 a) / \hbar^2$ .

- b) (3 Punkte) Diskutieren Sie für  $V_0 = 0$  die Auswirkungen des Potentialtopfes (i) auf die Wellenfunktionen bei  $|x| > L/2$ , (ii) deren Randbedingungen bei  $|x| = L/2$  sowie (iii) auf das Energiespektrum des Problems.
- c) (5 Punkte) Der Paritätsoperator  $\hat{P}$  wirkt auf Zustände  $\Phi(x)$  als  $\hat{P}\Phi(x) = \Phi(-x)$ . Zeigen Sie, dass der Paritätsoperator mit dem Hamilton-Operator  $\hat{H}$  (für  $V_0 \geq 0$ ) kommutiert, und diskutieren Sie die Konsequenzen für die Eigenzustände  $\Psi(x)$  von  $\hat{H}$ . Verknüpfen Sie dann  $A, B, C, D$  für den allgemeinen Ansatz

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (45)$$

- d) (9 Punkte) Bestimmen Sie für  $V_0 > 0$  zuerst die ungeraden und dann die geraden Lösungen von Gl. (44) mit dem Ansatz (45) und berechnen Sie die Energieeigenwerte.

*Hinweis:* Die Lösung darf noch eine Normierungskonstante beinhalten. Die trigonometrischen Relationen  $\cos(\varphi) = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$ ,  $\sin(\varphi) = (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})/2i$ ,  $\tan(\varphi) = \sin(\varphi)/\cos(\varphi)$  und  $\cot(\varphi) = \cos(\varphi)/\sin(\varphi)$  könnten nützlich sein.

#### Lösungsskizze:

- a) Die stationäre Schrödingergleichung für ein freies Teilchen in einer Dimension ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x) = E \Psi(x). \quad \text{1 Punkt} \quad (46)$$

Dies ist eine lineare, gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten, somit erhält man mit einem Exponentialansatz die Lösungen

$$\Psi_1(x) = Ae^{ikx}, \quad \text{1 Punkt} \quad (47)$$

$$\Psi_2(x) = Be^{-ikx}, \quad \text{1 Punkt} \quad (48)$$

wobei  $A$  und  $B$  Konstanten sind und  $k$  die Dispersionsrelation  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  erfüllt **1 Punkt**.

b) (i) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für  $|x| > L/2$  muss verschwinden

$$\Psi(|x| > L/2) = 0, \quad \text{1 Punkt} \quad (49)$$

da das Potential dort unendlich ist.

(ii) Aufgrund der Stetigkeit von  $\Psi(x)$  gilt somit auch die Randbedingung

$$\Psi(\pm L/2) = 0. \quad \text{1 Punkt} \quad (50)$$

(iii) Damit sind nur noch bestimmte Impulswerte  $k$  erlaubt, welche die Randbedingung erfüllen können. Dies führt zu einem diskreten Energiespektrum  $k_n$

1 Punkt

c) Wir berechnen den Kommutator, indem wir ihn auf eine beliebige, zweimal differenzierbare Testfunktion  $f(x)$  anwenden

$$[\hat{H}, \hat{P}]f(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)\hat{P}f(x) - \hat{P}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)f(x) \quad (51)$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)f(-x) - \left(-(-1)^2\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(-x)\right)f(-x) \quad (52)$$

$$= (V(x) - V(-x))f(-x) = 0, \quad \text{2 Punkte} \quad (53)$$

da  $V(x) = V(-x)$ . Somit besitzen der Hamiltonian und der Paritätsoperator eine gemeinsame Basis aus Eigenfunktionen. Wir können also gemeinsame Eigenzustände mit dem Paritätsoperator wählen, dies sind symmetrische (gerade) und antisymmetrische (ungerade) Funktionen 1 Punkt

Als nächstes betrachten wir ausgehend vom gegebenen Ansatz

$$\Psi(-x) = \begin{cases} Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, & x > 0 \\ Ce^{-ikx} + De^{ikx}, & x < 0. \end{cases} \quad (54)$$

Für den geraden Fall muss  $\Psi(x) = \Psi(-x)$  gelten, also

$$A = D \quad C = B. \quad \text{1 Punkt} \quad (55)$$

Im ungeraden Fall gilt hingegen  $\Psi(x) = -\Psi(-x)$  gelten, also

$$A = -D \quad C = -B. \quad \text{1 Punkt} \quad (56)$$

d) Im Folgenden bezeichnet  $\lambda = \frac{2m}{\hbar^2}V_0a$ .

### Ungerade Lösung

Für den ungeraden Fall erhalten wir aus der vorherigen Teilaufgabe den vereinfachten Ansatz

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ -Be^{ikx} - Ae^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (57)$$

Nun nutzen wir die Stetigkeit von  $\Psi(x)$  und die Sprungbedingung der Ableitung (??) bei  $x = 0$  und erhalten die beiden Gleichungen

$$\begin{cases} A + B = -B - A, \\ ik(-B + A) - ik(A - B) = \lambda(A + B), \end{cases} \quad \text{1 Punkt} \quad (58)$$

in Kombination also  $A + B = 0$  und somit ist die Lösung bis auf eine Normierungskonstante

$$\Psi(x) = A \begin{cases} e^{ikx} - e^{-ikx}, & x < 0 \\ e^{ikx} - e^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \propto A \sin(kx). \quad \text{1 Punkt} \quad (59)$$

Da die ungerade Lösung immer  $\Psi(0) = 0$  erfüllt, hat die Sprungbedingung ?? also gar keine Auswirkung, das Teilchen spürt das Delta-Potential nicht!  
Die Energieeigenwerte erhalten wir aus den Randbedingungen des unendlichen Potentialtopfes, i.e.  $\Psi(\pm L/2) = 0$ . Wir erhalten in diesem Fall für die Wellenvektoren

$$\sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \Rightarrow \frac{k_n L}{2} = n\pi \Leftrightarrow k_n = \frac{2n\pi}{L} \quad \text{1 Punkt} \quad (60)$$

wobei  $n \neq 0$  eine natürliche Zahl ist und somit die Energieeigenwerte

$$E_n^{\text{ungerade}} = \frac{\hbar^2 (2n)^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{1 Punkt} \quad (61)$$

### Gerade Lösung

Für den geraden Fall erhalten wir den vereinfachten Ansatz

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Be^{ikx} + Ae^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (62)$$

Nun nutzen wir die Stetigkeit von  $\Psi(x)$  und die Sprungbedingung der Ableitung (siehe Aufgabenstellung) und erhalten die beiden Gleichungen

$$\begin{cases} A + B = B + A, \\ ik(B - A) - ik(A - B) = \lambda(A + B), \end{cases} \quad \text{1 Punkt} \quad (63)$$

in Kombination also  $B = \frac{2ik + \lambda}{2ik - \lambda} A$  **1 Punkt**. Somit ist die Lösung bis auf eine Normierungskonstante

$$\Psi(x) = \frac{A}{2ik - \lambda} \begin{cases} (2ik - \lambda)e^{ikx} + (2ik + \lambda)e^{-ikx}, & x < 0 \\ (2ik + \lambda)e^{ikx} + (2ik - \lambda)e^{-ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (64)$$

$$= \frac{2iA}{2ik - \lambda} \begin{cases} 2k \cos(kx) - \lambda \sin(kx), & x < 0 \\ 2k \cos(kx) + \lambda \sin(kx), & x > 0. \end{cases} \quad \text{1 Punkt} \quad (65)$$

$$= A(2k \cos(kx) + \lambda \sin(k|x|)) \quad (66)$$

Anders als im ungeraden Fall spielt das Potential hier also durchaus eine Rolle. Die Energieeigenwerte erhalten wir aus den Randbedingungen des unendlichen Potentialtopfes, i.e.  $\Psi(\pm L/2) = 0$ . Wir erhalten in diesem Fall für die Wellenvektoren

$$2k \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + \lambda \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \Rightarrow -\frac{2k}{\lambda} \cot\left(\frac{kL}{2}\right) = 1. \quad \text{1 Punkt} \quad (67)$$

was nicht analytisch lösbar ist, aber formal die Lösungen  $k_n$  besitzt und wir erhalten die Energieeigenwerte

$$E_n^{\text{gerade}} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}. \quad \text{1 Punkt} \quad (68)$$